

В хлоридсодержащем боратном буфере с pH 7,38 медь переходит в пассивное состояние, которое нарушается при потенциалах выше потенциала пробоя ($E_{пр}$). Однако образование первых репассивирующихся питтингов на меди отмечается уже при потенциале коррозии ($E_{кор}$). При $C_{Cl^-} = 50$ mM $E_{пр}$ уменьшается с повышением температуры, что обусловлено изменением структуры и толщины пассивной пленки на меди.

1. Рылкина М.В., Андреева Н.П., Кузнецов Ю.И. // Защита металлов. 1993. Т. 29, № 2. С. 207–214.

СИНТЕЗ ФТОРИДА КАЛЬЦИЯ И ОПТИКА КОНДЕНСАТОВ НА ЕГО ОСНОВЕ

Дотдаева Б.М., Голота А.Ф.

Северо-Кавказский федеральный университет
355029, г. Ставрополь, пр. Кулакова, д. 2

Необычные оптические свойства фторидов — это, главным образом, результат специфических свойств фтора: высокая электроотрицательность, малая поляризуемость и слабая ковалентность металл—фтор связей. Ими объясняется низкий показатель преломления, широкая область пропускания и сдвиг 4- f уровней на более низкие длины волн. Оптические свойства фторидов используются для превращения энергии, передачи сигналов, дисплеях, информационных запоминающих устройствах, регистрации жестких излучений, в сложных лазерных системах, в том числе с перестраиваемой частотой генерации и др. Кристаллы фторидов кальция и бария, обладая достаточно низким показателем преломления, характеризуются широким диапазоном спектральной прозрачности, для фторида кальция — 120—10000 нм и для фторида бария — до 14000 нм. Край фундаментального поглощения фторида кальция — ионного соединения с широкой запрещенной зоной, находится в области вакуумного ультрафиолета ≈ 12 эВ. Условия получения фторида кальция для тонкослойной оптики таковы, что в нем могут содержаться как вакансии, так и примеси ионов кислорода, проявляющиеся при замещении атомов фтора на близкие по ионному радиусу атомы кислорода. При этом наличие ионов O^{2-} сдвигает край оптического поглощения до энергии порядка 5—5,6 эВ. Исследованиями примесного поглощения в CaF_2 показано, что полосы поглощения могут принадлежать как ионам O^{2-} , так и компенсирующим заряд вакансии. Поэтому представляет интерес теоретическое изучение энергетической структуры этого соединения.

при наличии вакансий и ионов O^{2-} . Кластерные расчеты CaF_2 проводили X_α -методом рассеянных волн и дискретного варьирования с различными способами учета кристаллического окружения, начиная от простого ведения заряженной сферы Ватсона или учета электростатического потенциала Маделунга для точечных ионов до наиболее адекватного подхода «внедренного» кластера с псевдопотенциальными граничными условиями. Поскольку энергетическое положение валентных $3d$ -состояний кальция существенно более чувствительно к учету правильного окружения, чем положение заполненных $2p$ -состояний фтора, для расчета был выбран кластер $[CaF_8]^{6-}$, учитывающий ближайшие к иону Ca^{2+} атомы фтора, расположенные в углах куба. В кластере $[Ca_4F_7]^+$ ни один из ионов Ca^{2+} не имеет правильного окружения из атомов фтора. Для расчета электронной структуры кластеров в решетке CaF_2 , в данной работе использовался X_α -метод дискретного варьирования. В базис численных атомных орбиталей включались $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -состояния нейтрального атома фтора и $1s$ -, $3d$ -, $4s$ -, $4p$ -орбитали кальция. Исследование дефектов решетки CaF_2 на край поглощения проводилось на основании сравнительного анализа энергетической диаграммы свободного кластера в идеальном фториде кальция — $[CaF_8]^{6-}$, кластера с одной вакансией в окружении фтора $[CaF_7]^{5-}$ и системы с вакансией и одним замещенным ионом кислорода, расположенным на диагонали куба — $[CaF_6O]^{6-}$. Появление примеси кислорода, как следует из расчета кластера $[CaF_6O]^{6-}$, приводит к дальнейшему сдвигу края поглощения: переходы из валентной $2p$ -полосы на нижний вакантный уровень имеют энергию до 7,5 эВ. Теоретические расчеты подтверждаются данными спектров пропускания в ВУФ-области. Прокаленный в защитной атмосфере HF фторид кальция не имеет поглощения в области от 130 до 240 нм. Дефектный фторид кальция имеет четкий пик поглощения в области 160—155 нм.

УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ ГАЗОФТОРИДНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ НИТРИДА АЛЮМИНИЯ

Елагин А.А., Григорьев В.В., Шишкин Р.А., Бекетов А.Р., Баранов М.В.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Нитрид алюминия является уникальным материалом по своим физико-химическим свойствам. AlN обладает высокой теплопроводностью — до 300 Вт/(м·К), высокими удельным электрическим сопротивлением (10^{13} Ом·см) и относительной диэлектрической проницаемостью (8,8), имеет высокий показатель твердости — 9 по шкале Мооса и низкое